TEMA 6. Химическая термодинамика и биоэнергетика (продолжение). Термодинамика химического равновесия.

Цель занятия:

Развитие знаний и системного подхода к рассмотрению равновесных процессов, имеющих медико-биологическое значение; сущности основных положений теории химического равновесия.

Задачи занятия:

- 1.) Формирование и развитие умений:
- определять направление и глубину протекания химических и биохимических процессов при различных воздействиях на систему и экспериментального изучения смещения химического равновесия;
- записывать выражение констант равновесия для гомо- и гетерогенных реакций;
- оценивать направление химической реакции при данных концентрациях реагентов и продуктов реакции по значениям изменения энергии Гиббса и констант равновесия.
- определять направление смещения химического равновесия при различных воздействиях (принцип Ле-Шателье).
- прогнозировать возможности и направления смещения химических реакций.
- экспериментального изучения влияния различных факторов на химическое равновесие.
- 2) Развить практические умения обращаться с лабораторным оборудованием, проводить химический эксперимент, соблюдая правила техники безопасности.
- 4) Воспитать ценностное отношение к химическим объектам.

Мотивационная характеристика необходимости изучения темы:

Изучение элементов химического равновесия дает знания, необходимые для понимания и усвоения последующих разделов данного курса.

Многие биохимические процессы в организме можно рассматривать как обратимые по направлению реакции. Среди них такие жизненно-важные процессы, как связывание гемоглобином кислорода, перенос диоксида углерода и транспортная роль белков, гидролиз универсального источника энергии для организма - АТФ и др. Зная константу равновесия можно дать качественную оценку направления многих биохимических превращений в организме для медицинской диагностики. В соответствии с принципом Ле-Шателье можно прогнозировать многие нарушения в организме, вызываемые температуры, И концентрации метаболитов; давления регулировать многие биохимические и физиологические процессы. В частности, понимать влияние изменений парциального давления кислорода на процесс переноса его в организме; смещение равновесий буферных систем на постоянство рН биологических жидкостей и тканей; распределение ионов по

обе стороны биологических мембран (равновесие Доннана); действие радиоактивного иона стронция, связанное с равновесным процессом замещения кальция - основного компонента костной ткани - на стронций. Резкое смещение химических равновесий в организме может вызвать смерть.

Вопросы для самоподготовки:

- 1. От каких факторов зависит числовое значение константы равновесия?
- 2. Влияет ли катализатор на положение равновесия? Зависит ли числовое значение константы равновесия от катализатора?
- 3. В какую сторону сместится равновесие

$$CO(\Gamma) + H_2O(\Gamma) \leftrightarrow CO_2(\Gamma) + H_2(\Gamma), \quad \Delta H^\circ = -43 \text{ кДж}$$

- а) при уменьшении концентрации воды;
- б) при увеличении температуры;
- в) при уменьшении давления?

Используя значение констант равновесия, определите равновесные концентрации ионов водорода в следующих системах:

- a) $NH_4^+ \leftrightarrow NH_3 + H^+$;
- 6) $[Fe(H_2O)_6]^{3+} \leftrightarrow [FeOH(H_2O)_5]^{2+} + H^+$

если равновесная концентрация исходного вещества равна 0,1 моль/л.

- 4. Какое состояние является пределом протекания химических и фазовых превращений? Почему оно устойчиво?
- 5. Назовите термодинамические критерии равновесного состояния.
- 6. Какое из состояний равновесное, стационарное характерно для живой клетки?
- 7. Сформулируйте закон действующих масс для равновесия. От каких факторов зависит и не зависит константа равновесия (природы реагирующих веществ, концентрации, давления, наличия катализатора, температуры)?
- 8. Каково соответствие между значениями константы равновесия K > 1, < 1, = 1) и значениями $\Delta G^{\circ} (< 0, > 0, = 0)$?

Вопросы для аудиторного контроля знаний:

Понятие о химическом равновесии. Константа химического равновесия. Смещение химического равновесия при изменении температуры, давления и концентрации. Принцип Ле-Шателье. Уравнения изотермы и изобары химической реакции. Использование термодинамических расчетов согласно закону Гесса, второму закону термодинамики и объединенному уравнению второго законов термодинамики В молекулярном макромолекулярном докинге. Основы дизайна лекарственных соединений в рамках установления характера лиганд-рецепторных взаимоотношений согласно принципу минимума свободной энергии. Расчет константы ингибирования. Понятие о квантовохимических расчетах, позволяющих создавать реалистические модели лигандов и рецепторов для использования в молекулярном и макромолекулярном докинге.

Тесты для проверки уровня знаний:

1. Какое из выражений соответствует константе равновесия реакции

$$\text{a)} \ \frac{[CO][Cl_2]}{[COCl_2]}; \ \ \text{6)} \ \frac{[Cl_2]}{[COCl_2]}; \ \ \text{B)} \ \frac{[COCl_2]}{[CO][Cl_2]}; \ \ \text{r)} \ \frac{[COCl_2]}{[Cl_2]}$$

- 2. Константа равновесия системы $CaCO_3(T) \xleftarrow{t} CaO(T) + CO_2(\Gamma)$ при некоторых условиях равна 0,5. Действие какого фактора изменит величину константы равновесия?
- а) $P_{\text{общее}}$; б) $C(CO_2)$; в) T; Γ) катализатор
- 3. Действием какого фактора можно сместить влево равновесие обратимой реакции $C(\tau) + H_2O(\pi a p) \leftrightarrow CO(\tau) + H_2(\tau) Q$?
- а) повышением температуры;
- б) увеличением давления;
- в) уменьшением давления;
- г) введением катализатора
- 4. Вычислить равновесную концентрацию (моль/л) аммиака в системе $N_2(\Gamma) + 3H_2(\Gamma) \leftrightarrow 2NH_8(\Gamma)$, если исходные концентрации азота и водорода соответственно равны 2 и 7 моль/л и к моменту установления равновесия прореагировало $10\% N_2$?
- a) 0,2; б) 0,4; в) 1,8; г) 3,6
- 5. Чему равна константа равновесия реакции при 1000 К, если изменение энергии Гиббса реакции равно 38,2 кДж? Что характеризует рассчитанное значение константы равновесия?
- a) 10^2 ; б) 10^{-2} ; в) $10^{-0.002}$; г) $10^{+0.002}$

Учебно-исследовательская работа (УИРС):

"Качественные опыты по химическому равновесию"

Опыт 1. Смещение химического равновесия при изменении концентрации реагентов.

Для опыта воспользуемся реакцией образования железа (Ш) тиоцианата: $FeCl_3 + 3KNCS \leftrightarrow Fe(NCS)_3 + 3KCl$ (точнее, в данной реакции получаются тиоцианатные комплексы железа (Ш) с числом тиоцианатных групп у атома железа от 1 до 6).

Железо (Ш) тиоцианат интенсивно окрашен в красный цвет, раствор $FeCl_3$ – в желтоватый, а растворы KNCS и KCl бесцветны. При изменении концентрации $Fe(NCS)_3$ окраска раствора изменяется, что позволяет визуально установить направление смещения равновесия.

В лабораторном журнале для записи и анализа наблюдений подготовьте таблицу по следующей форме:

Пробирка	Добавлено	Наблюдение –	Вывод –
	в пробирку	изменение	направление
		интенсивности	смещения
		окраски	равновесия
1	FeCl ₃ (p)		
2	KNCS (p)		
3	KCl (T)		
4	-		

К 20 мл воды в небольшом стакане прибавьте по 1-2 капли насыщенных растворов FeCl₃ и KNCS. Полученный раствор разлейте в четыре пробирки. Затем в 1-ю пробирку прибавьте несколько капель концентрированного раствора FeCl₃. Что наблюдается? Запишите в таблицу наблюдаемое изменение окраски и укажите направление смещения равновесия (стрелка вправо или влево).

Затем во 2-ю пробирку прибавьте несколько капель концентрированного раствора KNCS. Снова отметьте и запишите в таблицу наблюдаемое изменение окраски и укажите направление смещения равновесия. Наконец, в 3-ю пробирку прибавьте немного кристаллического KCl. Сравните окраску в 3-й пробирке после прибавления KCl с окраской раствора в пробирке 4-й, которую оставьте для сравнения, запишите изменение окраски и укажите направление смещения равновесия. Запишите, соответствуют ли наблюдаемые направления смещения химического равновесия принципу Ле Шателье.

Опыт 2. Смещение химического равновесия при изменении температуры. В стакане вместимостью 250 мл нагрейте воду (почти до кипения). В две пробирки внесите по 4-5 мл раствора крахмала и прибавьте туда же по 3-4 мл раствора дииода. Запишите наблюдения (цвет образовавшегося раствора). Нагрейте одну из пробирок, опустив её на несколько минут в стакан с горячей водой. Вторую пробирку оставьте для сравнения. Наблюдайте изменение окраски. Как изменяется окраска раствора в нагретой пробирке по сравнению с холодной? Запишите наблюдения в лабораторный журнал. Охладите нагретую пробирку. Что происходит? Запишите уравнение изученного равновесия:

 I_2 + Крахмал ↔ [I_2 · Крахмал] желтый бесцветный синий

Основываясь на результатах наблюдений, сделайте вывод о направлении смещения равновесия в системе при её нагревании и охлаждении. Исходя из принципа Ле Шателье, ответьте на вопрос — экзо- или эндотермической является реакция образования иодокрахмала и реакция его диссоциации.

В отчете по лабораторной работе запишите также выражения закона действующих масс для изученных равновесий.

Задания для самостоятельной работы:

- 1. В некоторых условиях способность веществ A и B к взаимодействию по реакции 2A + B \leftrightarrow 2C характеризуется величиной ΔG^{o} , равной -
 - 1,7кДж/моль, в других условиях $\Delta G^{o} =$ 33,4 кДж/моль. В каких условиях
 - а) константа равновесия реакции больше;
 - б) больше глубина протекания реакции;
 - в) реакция дальше от равновесного состояния?
- 10. Причиной токсичности оксида углерода (угарного газа) является преобладающая над кислородом способность его связывать гемоглобин:

$$H_BO_{2(p)} + CO_{(r)} \rightarrow H_BCO_{(p)} + O_{2(r)}$$

Как помочь больному:

- а) увеличить (уменьшить) общее давление;
- б) увеличить (уменьшить) концентрацию или парциальное давление кислорода, например, вынести больного на свежий воздух, использовать кислородную подушку (обратные воздействия)?
- 11. Рассчитать константу равновесия процесса оксигенирования гемоглобина при 25° C, если ΔG° реакции равно 1,56 кДж/моль.

Список литературы:

Основная:

- 1. Общая химия: учебное пособие / С.В.Ткачёв, В.В.Хрусталёв. Минск: Вышэйшая школа, 2020. гл.5.
- 2. Ершов, Ю. А. Общая химия. Биофизическая химия. Химия биогенных элементов: учеб. для студентов мед., биол., агрон., ветеринар., экол. вузов / Ю. А. Ершов, В. А. Попков, А. С. Берлянд; под ред. Ю. А. Ершова. 10-е изд., перераб. и доп. Москва: Юрайт, 2014.- гл.9 (9.1-9.8);
- 3. Общая и бионеорганическая химия : пособие для студентов учреждений высш. образования, обучающихся по специальностям: 1-79 01 01 «Лечебное дело», 1-79 01 02 «Педиатрия», 1-79 01 07 «Стоматология», 1-79 01 08 «Фармация» / В. П. Хейдоров [и др.]; М-во здравоохранения Республики Беларусь, УО «Витебский гос. ордена Дружбы народов мед. ун-т»; под ред. В. П. Хейдорова. Витебск : [ВГМУ], 2023. 524, [1] с. : ил. Библиогр.: с. 522-523.

Дополнительная:

1.Болтромеюк, В.В. Общая химия: пособие для студентов обучающихся по специальностям 1-79 01 01 «Лечебное дело», 1-79 01 02 «Педиатрия», 1-79 01 04 «Медико-диагностическое дело», 1-79 01 05 «Медико-психологическое дело», 1-79 01 06 «Сестринское дело» / В.В. Болтромеюк. — Гродно: ГрГМУ, 2020. — 47-53 с, 166-203 с.